

УДК 544. 18

## ИЗУЧЕНИЕ ИЗМЕНЕНИЯ МОДУЛЯ ЮНГА ЛИСТА ГРАФЕНА В ЗАВИСИМОСТИ ОТ НАПРАВЛЕНИЯ ДЕФОРМАЦИИ

Н.Г. Чуклина<sup>1</sup>

Иркутский государственный технический университет,  
664074, Россия, г. Иркутск, ул. Лермонтова, 83.

В данной статье в рамках теории функционала плотности было определено влияние растяжения листа графена по *zigzag* и *armchair* направлениям на модуль упругости. В работе были рассчитаны равновесные геометрии для всех исследуемых структур и рассчитан модуль Юнга. Показано, что в направлении *armchair* значение модуля упругости графена выше, чем в направлении *zigzag*.

Ил. 2. Табл. 1. Библиогр. 7 назв.

Ключевые слова: графен; модуль Юнга; B3LYP; SVP.

### STUDY OF CHANGE IN YOUNG'S MODULUS GRAPHENE SHEET DEPENDING ON DEFORMATION DIRECTION

N. Chuklina

Irkutsk State Technical University  
83 Lermontov Str., Irkutsk, Russia, 664074.

In the framework of density functional theory the author of the paper determines the influence of stretching of the graphene sheet in zigzag and armchair directions on elastic modulus. The author of the paper has calculated the equilibrium geometries and Young's modulus for all investigated structures. The paper shows that in armchair direction the value of modulus of graphene elasticity is higher than that in zigzag direction.

Keywords: graphene; Young's modulus; B3LYP; SVP.

Многие из перспективных направлений развития в материаловедении, наноэлектронике и прикладной химии связаны с применением графена. Это обусловлено тем, что он обладает уникальными структурными, химическими и электрическими свойствами [1]. Особое внимание привлекают высокие значения модуля упругости графена, так, у «идеального» графена он составляет примерно 1000 ГПа [2]. Это позволяет использовать его для создания нанорезонаторов, графеновых полевых транзисторов, графеновых нанолент [3].

Мы видим, что существует достаточное количество работ, в которых определялся модуль Юнга графена. Однако до сих пор не выяснено, зависит ли значение модуля Юнга от направления приложенной растягивающей силы. Для выяснения этой зависимости в данной работе были приведены квантово-химические расчеты в рамках теории функционала плотности.

В качестве исследуемой модели листа графена нами была выбрана структура C<sub>60</sub>H<sub>20</sub> (рис. 1). Концевые связи были насыщены водородом для того, чтобы избежать эффекта «оборванных» связей.

Для всех вычислений использовалась программа Orca 2.9.1 [4]; для визуализации – программа Chemcraft. Расчеты проводились в рамках теории функционала плотности (DFT), был использован функционал B3LYP [5, 6]. В качестве базисного набора был выбран набор SVP [7].

Метод расчета модуля Юнга заключается в следующем. Первоначально мы рассматриваем недеформированную модель, оптимизируем ее структуру и получаем значение полной энергии. Далее мы рассматриваем деформацию по *armchair* и *zigzag* направлениям (рис. 2 а, б). Для этого в используемой модели увеличиваем длину листа графена на 1 %, закрепляем концевые атомы и оптимизируем структуру по *armchair* и *zigzag* направлениям соответственно.

<sup>1</sup> Чуклина Надежда Геннадьевна, студентка 4 курса физико-технического института, e-mail: nadyushka\_chuklina@mail.ru  
Chuklina Nadezda, a fourth-year student of Physics and Technology Institute, e-mail: nadyushka\_chuklina@mail.ru

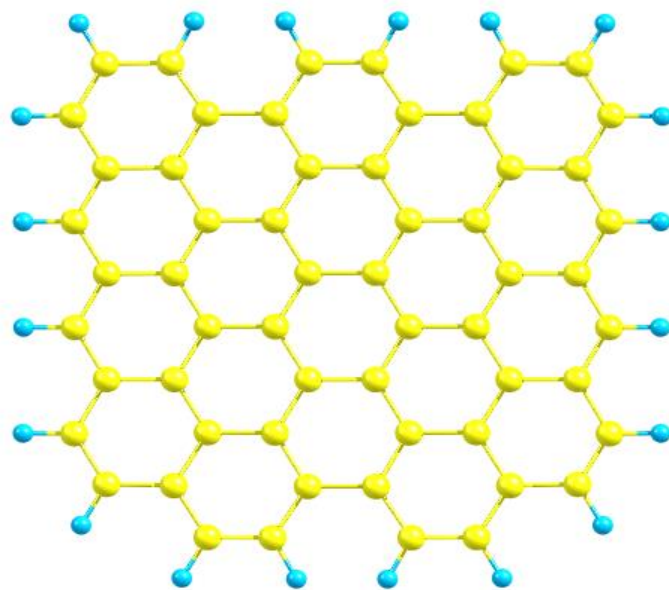


Рис. 1. Структурная модель недеформированного графена

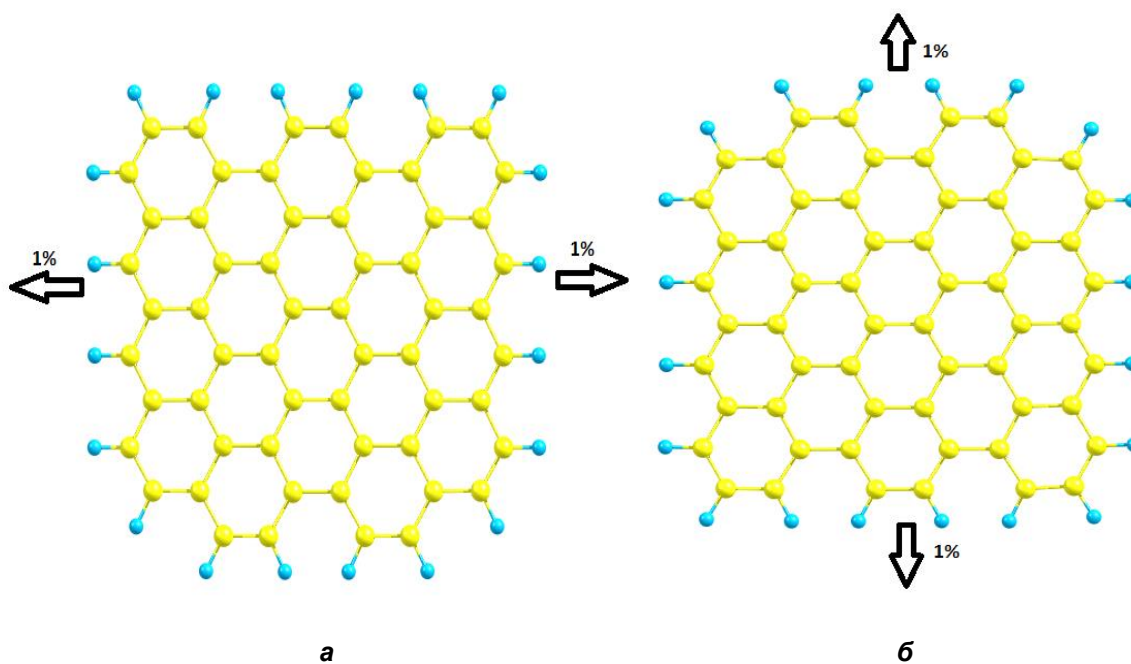


Рис. 2. Растяжение листа графена: *а* – по *zigzag* направлению на 1 %; *б* – по *armchair* направлению на 1 %

Модуль Юнга рассчитываем по формуле

$$Y = \left(\frac{\Delta E}{S}\right) \times \left(\frac{L}{\Delta L^2}\right),$$

где

$S$  – площадь сечения листа графена, по которому распределено действие растягивающей силы;

$L$  – длина недеформированного листа графена;  
 $\Delta L$  – изменение длины графена при растяжении;  
 $\Delta E$  – изменение полной энергии графена.

В данной работе площадь листа графена  $S$  определяется по формуле для площади прямоугольника, толщиной  $a$  :

$$S = L \times a,$$

где  $a$  – межплоскостное расстояние в графене (3.4 Å), а  $L$  – длина листа графена. Берется значение длины  $L$ -той стороны, которая не подвергается деформации.

В результате проведенных расчетов, были получены следующие данные для двух направлений деформации (таблица).

Тип направления	$\Delta E \times 10^{-20}$ , Дж	$S \times 10^{-20}$ , Å <sup>2</sup>	$\gamma$ , ТПа
zigzag	3,08	0,376	0,713
armchair	4,25	0,391	0,984

Анализируя табличные данные, мы видим, что модуль упругости листа графена выше при приложении растягивающей силы в *armchair* направлении (0,984 ТПа). По-видимому, это связано с тем, что при данном растяжении в основном происходит увеличение валентных углов. Увеличение длин С-С связей, которое преимущественно происходит при растяжении в *zigzag* направлении требует немного меньшей энергии (0,713 ТПа).

В данной статье методами квантовой химии было показано, что значения модуля упругости, полученные при деформации в *armchair* и *zigzag* неодинаковы – соответственно 0,984 и 0,713 ТПа. Это говорит о неравнозначности изменений, возникающих в листе графена при деформациях в двух данных направлениях. Дальнейшее изучение структурных изменений, возникающих в графене при деформации, будет темой будущих работ.

### Библиографический список

1. Tzalenchuk A. et al. Towards a quantum resistance standard based on epitaxial graphene (англ.) // Nature Nanotechnology. – 2010. – С. 186–189.
2. А. С. Федоров и др. Подвижность вакансий при деформации и их влияние на упругие свойства графена // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2011. – Т. 139. – Вып. 5.
3. Meyer J. C. et al. The structure of suspended graphene sheets Nature 446, 60 (2007).
4. Neese F., ORCA-ab initio. Density Functional and Semiempirical Program Package (v. 2.9.1), Universitar Bonn, 2009.
5. Becke A.D. Density-Functional Exchange-Energy Approximation with Correct Asymptotic Behavior // Phys.Rev.A.1988.38. P. 3098–3100.
6. Perdew J.P. Densit-functional approximation for the correlation energy of the inhomogeneous electron gas // Phys. Rev. A. 1986.33. P. 8822–8824.
7. Schaefer A., Horn., Ahlrichs. R.J. Fully optimized contracted Gaussian – basis sets for atoms Li to Kr // Chem. Phys. 1992.97. P. 2571–2577.